

**Н. И. Шалин<sup>1,2</sup>, О. Д. Фоминых<sup>1</sup>,  
А. А. Калинин<sup>1</sup>, М. Ю. Балакина<sup>1,2</sup>**

*<sup>1</sup>Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова,  
ФИЦ Казанский научный центр РАН,  
420088, Россия, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, 8,  
mbalakina@yandex.ru,*

*<sup>2</sup>Химический институт им. А. М. Бутлерова – КФУ,  
420008, Россия, г. Казань, ул. Кремлевская, 29/1,  
shalinnikita@mail.ru*

## **МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ДИЗАЙНЕ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ, ДОПИРОВАННЫХ ИНДОЛИЗИНОВЫМИ ХРОМОФОРАМИ С ИЗОЛИРУЮЩИМИ ГРУППАМИ В ДОНОРНОМ И АКЦЕПТОРНОМ ФРАГМЕНТАХ\***

**Ключевые слова:** индолизиновые хромофоры, нелинейно-оптические полимеры, атомистическое моделирование, изолирующие группы.

Молекулярное моделирование используется при решении ключевых проблем дизайна новых полимерных материалов с квадратичными нелинейно-оптическими (НЛО) свойствами. Подобные материалы предназначены для использования в фотонике и оптоэлектронике. Органические дипольные хромофоры со структурой Д- $\pi$ -А являются молекулярными источниками НЛО активности материала. В настоящей работе проведено моделирование композиционных материалов на основе РММА, в которых гостями служат хромофор с 1-метил-2-фенилиндозин-3-ил донорным (МРІ-3) и трицианофурановым (ТСF) акцепторным фрагментами, соединенными октатетраеновым (ОТ)  $\pi$ -сопряженным мостиком [1], а также его производные, содержащие изолирующие группы в Д/А фрагментах (рисунок 1).

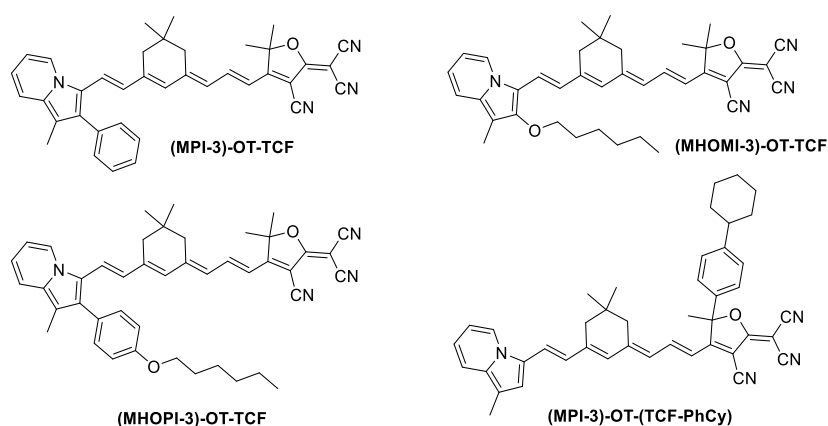


Рисунок 1. Исследованные хромофоры-гости

Методом молекулярной динамики были исследованы материалы **PMMA/(MPI-3)-OT-TCF** с содержанием гостей 10, 15 и 30 масс. %; содержание замещенных хромофоров в полимерной матрице составляло 30 масс. %. Полимерная матрица моделировалась десятью олигомерами по 60 звеньев каждый; использовался протокол моделирования, разработанный в [2].

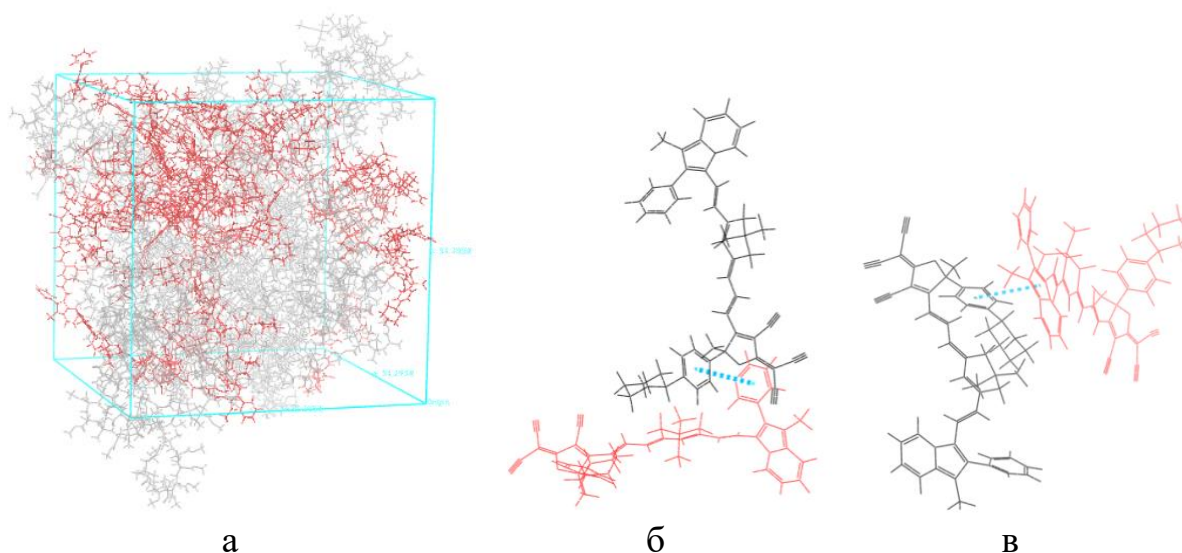


Рисунок 2. Распределение хромофоров (MPI-3)-OT-(TCF-PhCy) в материале (а); примеры невалентных взаимодействий между хромофорами (б) и (в).

Показано, что при 10 и 15 масс. % содержании **(MPI-3)-OT-TCF** хромофоры не агрегируют; незначительное число хромофоров участвует в невалентном взаимодействии друг с другом лишь при содержании 30 масс. %. В материале **PMMA/(MHORI-3)-OT-TCF** доля хромофоров, участвующих в связывании, чуть меньше, чем в случае исходного хромофора (10 % против 13 %). В случае **(MPI-3)-OT-(TCF-PhCy)** наличие объемной 4-циклогексилфенильной группы привело к заметному росту числа невалентных связей между хромофорами. При использовании **(MHOMI-3)-OT-TCF** хромофоры полностью изолированы даже при таком высоком 30 масс. %

содержании в материале. Таким образом, гексилотриметильный заместитель в донорном фрагменте является эффективной изолирующей группой, что позволяет увеличить содержание хромофоров в матрице, обеспечивая рост НЛО активности композиционного материала.

#### Список литературы

1. Kalinin A. A., Fazleeva G. M., Burganov T. I. et al. // J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry. 2020. Vol. 386, № 112125.
2. Fominykh O. D., Sharipova A. V., Balakina M. Yu. // Comp. Mat. Sci. 2019. Vol. 168. P. 32–39.

*\* Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 16-13-10215.*

УДК 547.721

**Р. О. Щербаков, А. А. Меркушев, М. Г. Учускин**

*Пермский государственный национальный  
исследовательский университет,  
614990, Россия, г. Пермь, ул. Букирева, 15,  
vispan1@mail.ru*

### **ПЕРЕГРУППИРОВКА ЗАМЕЩЕННЫХ 3-(ФУРАН-2-ИЛ)АЛКАН-1-ОНОВ В ОКИСЛИТЕЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ**

**Ключевые слова:** окислительные перегруппировки, фураны,  $\alpha,\beta$ -ненасыщенные соединения.

Фураны демонстрируют реакционную способность, характерную для классических гетероароматических соединений. Однако они могут проявлять себя как 1,4-дикарбонильные соединения или енольные эфиры в зависимости от различных реакционных условий и реагентов. Одним из направлений в химии фуранов является селективное окисление, которое приводит к ряду важных промежуточных соединений, используемых в дальнейшем органическом синтезе [1].

Ранее профессор Йин показал, что перегруппировка 2-оксоалкилфуранов в окислительных условиях приводит к 2-(2-ацилвинил)фуранам [2]. Позднее мы показали, что перегруппировка 2-(2-аминобензил)фуранов в окислительных условиях приводит к замещенным 2-(2-ацилвинил)индолам [3]. Продолжая исследования в области окислительных превращений замещенных фуранов, мы